

# Zweite Selbstevaluation der Computational Chemistry Coalition (CCC)

an der RWTH Aachen

April 2007

## Zeitpunkt der Gründung des Kompetenzzentrums

Die Computational Chemistry Coalition (CCC) wurde Mitte 2002 von den Aachener Professoren Bernhard Blümich, Richard Dronskowski und Manfred Martin konzipiert. Zu Beginn des Jahres 2003 war die CCC bereits mit elf Mitgliedern wissenschaftlich aktiv, und im April 2007 weist das RWTH-Kompetenzzentrum vierzehn eigenständig forschende Mitglieder auf. Die CCC wird von einem Sprecher (derzeit Richard Dronskowski, dritte Amtszeit) nach außen vertreten.

## Beteiligte Institutionen/Einrichtungen

Ihrer Intention gemäß versteht sich die CCC als institutsübergreifendes Kompetenzzentrum für Forschung und Lehre auf dem Gebiet der **Computational Chemistry**. Die CCC steht prinzipiell all denjenigen Mitgliedern der RWTH offen, die einerseits genügende Kompetenz auf dem Fachgebiet aufweisen und andererseits gewillt sind, mit eigenen Beiträgen chemische Probleme unter Zuhilfenahme ebendieser Methoden der **Computational Chemistry** zu lösen und auch aktiv ins Kompetenzzentrum einzubringen. Die vierzehn Mitglieder sind gegenwärtig:

- Prof. Dr. Dr. h.c. Bernhard **Blümich**, Lehrstuhl für Makromolekulare Chemie und Institut für Technische und Makromolekulare Chemie
- Hochschulassistent Roger **De Souza**, Ph.D., Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Richard **Dronskowski**, Lehrstuhl für Festkörper- und Quantenchemie und Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Ulli **Englert**, Institut für Anorganische Chemie

- Prof. Dr. Paul **Kögerler**, Lehr- und Forschungsgebiet Molekularer Magnetismus, Institut für Anorganische Chemie
- Priv.-Doz. Dr. Peter **Kroll**, Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Walter **Leitner**, Lehrstuhl für Technische Chemie und Institut für Technische und Makromolekulare Chemie
- Prof. Dr. Heiko **Lueken**, Lehr- und Forschungsgebiet Magnetochemie, Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Arne **Lüchow**, Lehr- und Forschungsgebiet Theoretische Chemie, Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Manfred **Martin**, Lehrstuhl für Physikalische Chemie I und Institut für Physikalische Chemie
- Priv.-Doz. Dr. Ilona **Merke**, Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Gerd **Raabe**, Institut für Organische Chemie
- Prof. Dr. Ulrich **Simon**, Lehrstuhl für Anorganische und Elektrochemie und Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Wolfgang **Stahl**, Lehr- und Forschungsgebiet Molekülspektroskopie, Institut für Physikalische Chemie

## Zielsetzung des Kompetenzzentrums

Die Zielsetzung der **CCC** orientiert sich am 1996 verabschiedeten Leitbild der RWTH, das als entscheidende Ziele einerseits die Ausbildung eines hochqualifizierten und verantwortungsbewußten akademischen Nachwuchses sowie die Forschung auf hohem Qualitätsniveau in allen Bereichen formuliert; beide Vorhaben sollen im Sinne praktizierter Interdisziplinarität angestrebt werden. Die Zielvereinbarung des Jahres 2002 hat obiges Programm hinsichtlich einer spezifischen Profilbildung präzisiert; unter anderem betont die RWTH die Bedeutung ihrer interdisziplinären Schwerpunkte **Material-** bzw. **Werkstoffwissenschaften** und **Informationstechnologie** und widmet sich dem Ausbau des besonders zukunftssträchtigen Schwerpunkts **Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen**. Diese richtige Weichenstellung hat die Fachgruppe Chemie an der RWTH schon vor Jahren fachlich vorweggenommen:

Für die Fachgruppe Chemie als Teil der Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften spiegelt sich die Interdisziplinarität ihrer Aktivitäten anhand ihrer Forschungsschwerpunkte **Werkstoffe/Mesoskopische Systeme**, **Asymmetrische Synthese/Wirkstoffe** und **Katalyse** entsprechend dem schon im Jahre 1997 verabschiedeten Strukturplan wider. Zusätzlich wurden in den vergangenen Jahren von einigen Arbeitsgruppen gewichtige Beiträge mit vorwiegend numerisch-theoretischem Charakter erarbeitet, die thematisch dem Arbeitsgebiet der **Computational Chemistry** entstammen. Der enorm hohe Rechenbedarf der Aachener Chemiker gibt sich seit vielen Jahren anhand der allgemein zugänglichen Nutzerstatistiken zu erkennen: In sehr guter Näherung wird die vom hiesigen Rechen- und Kommunikationszentrum bereitgestellte **Rechenleistung** fast ebenbürtig durch **Maschinenbau und Chemie** beansprucht, und dies obschon die Aachener Chemiker seit geraumer Zeit auf eigene Computerressourcen bzw. auswärtige Rechenzentren ausweichen (müssen).

Vor dem Hintergrund dieser rasanten Entwicklung wurde von der Aachener Chemie im Jahre 2002 die Notwendigkeit einer verstärkten Zusammenarbeit erkannt, um den bislang gewonnenen Kompetenzvorsprung auf dem Feld der **Computational Chemistry** sichern und weiter ausbauen zu können. Als besonders vielversprechende bzw. zukunftssträchtige Forschungsthematiken wurden fünf **Großthemen** benannt, deren gemeinsame Bearbeitung eine enorme Herausforderung darstellt, deren Lösung aber zur Sicherung der nationalen wie internationalen Spitzenstellung der Aachener Chemie beitragen soll:

- Atomistische Simulation von Struktur und Dynamik fester und weicher Materie mit und ohne Translationssymmetrie
- Quantenchemie hochgradig elektronenkorrelierter Moleküle und Festkörper
- Entwicklung einer praktikablen Bindungstheorie für (magnetisch aktive) intermetallische Phasen und magnetische Moleküle
- Quantenchemische Simulation und visuelle Aufbereitung NMR-spektroskopischer Meßverfahren an kondensierter Materie
- Übertragung quantenchemischer Observablen von Molekülen und fehlgeordneten Feststoffen in die makroskopische Thermodynamik

Daneben ist in Zukunft auch die Methodenentwicklung quantenmechanischer und klassischer Monte-Carlo-Simulationen für magnetische Systeme geplant, deren Komplexität ansonsten keine direkte Modellierung erlaubt. Für den allgemeinen Bereich von Forschung und Lehre hat die **CCC** die folgenden themenunabhängigen Ziele formuliert. In der **Forschung** bündeln die Mitglieder der **CCC** ihre jeweilige Kompetenz auf den betreffenden Teilgebieten der **Computational Chemistry** und stellen sie unter Erzielung von Synergieeffekten anderen Mitgliedern zur Verfügung. Die Lösung hochgradig komplexer chemischer Probleme mittels Techniken der **Computational Chemistry** ist vorrangiges Forschungsziel der **CCC**. Gleichzeitig wird die vorhandene Kompetenz innerhalb und außerhalb der RWTH klar präsentiert, um Interessierte am Sachverstand der **CCC** teilhaben zu lassen. Des weiteren bemühen sich alle Mitglieder der **CCC** darum, neue und attraktive Forschungsrichtungen im Bereich der **Computational Chemistry** zu identifizieren und konsequent mitzugestalten. Das mittelfristige Ziel der Einwerbung diesbezüglicher Drittmittel wurde schon von Anfang an erreicht. Zum Zwecke des wissenschaftlichen Gedankenaustauschs und der verbesserten Lehre veranstalten die Mitglieder der **CCC** regelmäßige Seminare und Vortragsveranstaltungen in den Räumen der chemischen Institute.

Im Bereich der **Lehre** erkennen die Mitglieder der **CCC** die Dringlichkeit, die mathematisch-theoretischen Fertigkeiten aller Chemiestudierenden qualitativ wie quantitativ zu verbessern. Entsprechende Kenntnisse werden als zukunftsorientiertes Qualitätsmerkmal und auch als Schlüsselqualifikation künftiger Aachener Chemieabgänger verstanden; ihre enorme Bedeutung wurde bereits in der Zielvereinbarung explizit vorweggenommen. Konsequenterweise setzt sich die **CCC** für einen Ausbau der chemieorientierten Informationstechnologie (beispielsweise Hochleistungsrechnen im Bereich der Chemie) an der RWTH ein und begrüßt eine Verstärkung der RWTH-internen IT-Angebote mit Nachdruck, darunter die Verbesserung der informationsrelevanten Basisausbildung (Programmierkurse). Schließlich befassen sich die Mitglieder der **CCC** intensiv und überaus erfolgreich mit der inhaltlichen Aktualisierung des Studiengangs Che-

mie, im besonderen hinsichtlich der soeben erfolgten Umstellung des Diplomstudien- gangs auf die BSc- und MSc-Studiengänge. Wie bereits in der letzten Selbstevaluation angestrebt, sind Lehrinhalte der **Computational Chemistry** nun zu festen Bestandteilen dieser Studiengänge geworden (s.u.) und haben *de facto* zu einer Erweiterung der Aa- chener Forschungsthematiken im Lehrbereich (s.u.) geführt.

## Kurzdarstellung der bisherigen und zukünftigen Aktivitäten

Ihrer Zielsetzung gemäß hat die **CCC** neben den regelmäßigen Seminarbeiträgen der chemischen Institute bereits im Frühjahr 2003 einen ersten RWTH-Workshop zur **Com- putational Chemistry** angeboten, der auch von anderen Fachgruppen (Mathematik, Informatik) besucht wurde. Mit diesen Kollegen wurden detaillierte Gespräche geführt, die insbesondere eine Verbesserung der studentischen Lehrsituation zum Ziel hatten. Eine große Kraftanstrengung war das im Jahr 2004 von der **CCC** konzipierte, realisierte und vollständig aus eigenen Mitteln finanzierte **RWTH-Themenheft über Computatio- nal Chemistry**; es war zugleich das erste RWTH-Themenheft, das durchgängig und aus- schließlich chemische Fragestellungen berührte.

Zum Zwecke des wissenschaftlichen Gedankenaustausches wurde im Rahmen der **CCC**-Aktivitäten in den Jahren 2005 und 2006 eine ganze Reihe renommierter Fachkollegen aus den Gebieten der **Computational Chemistry** bzw. **Theoretischen Chemie** zu Vorträgen nach Aachen eingeladen, darunter:

- **Prof. Dr. Marius Lewerenz**, Université Paris VI, **Anharmonische Schwingungsdy- namik in neutralen und geladenen Clustern**, IPC-Kolloquium (Juni 2005)
- **Prof. Dr. Michael Dolg**, Universität zu Köln, **Energiekonsistente *ab initio* Pseudopotentiale**, IPC-Kolloquium (Januar 2006)
- **Prof. Dr. Georg Jansen**, Universität Duisburg-Essen, **Intermolecular Interactions**, IPC-Kolloquium (Juni 2006)
- **Prof. Dr. Walter Thiel**, MPI Mühlheim/Ruhr, **Chemie mit dem Computer**, Fest- vortrag zur 100-Jahr-Feier der Physikalischen Chemie (Juli 2006)
- **Prof. Dr. Christel Marian**, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, **Relaxati- onspfade der Photoelektronen angeregter Moleküle**, IPC-Kolloquium (Novem- ber 2006)
- **Prof. Dr. Peter C. Schmidt**, TU Darmstadt, **Density Functional Theory**, IPC (No- vember 2006)

Von Mitgliedern der **CCC** wurden des weiteren folgende Veranstaltungen (zum Teil verantwortlich) veranstaltet, die entweder außerhalb der RWTH stattfanden oder pro- minente auswärtige Wissenschaftler an die RWTH führten:

- **Colloquium on Mobile NMR** (Perugia 2005 sowie Aachen 2006) mit ca. 50 bis 60 internationalen Teilnehmern, zusammen mit dem Kompetenzzentrum für Magnetische Resonanz MARC
- **13. Vortragstagung der GDCh-Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung über Modellierung in der Festkörper- und Materialchemie** (Aachen 2006) mit über 200 Teilnehmern aus dem In- und Ausland; Eröffnung durch den Rektor der RWTH, Univ.-Prof. Dr. B. Rauhut
- **International Conference on Nonstoichiometric Compounds** (Kauai 2005), gemeinsam mit der Northwestern University und der Tohoku University
- **International Symposium on Defects, Transport and Related Phenomena** (Cincinnati 2006), gemeinsam mit der Cornell University und der Northwestern University
- Workshop des Arbeitskreises **Computational Crystallography** der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie über **Molecular Dynamics and Crystallography** (Aachen 2005)
- Workshop des Arbeitskreises **Computational Crystallography** der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie über **Electron Density – Theory and Applications** (Aachen 2006)

Für die weitere Zukunft bereiten die Mitglieder der **CCC** folgende Veranstaltungen vor:

- Workshop des Arbeitskreises **Computational Crystallography** der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie über **The Electron Localization Function – Theory and Applications** (Aachen 2007)
- International Symposium on the Reactivity of Solids, ISRS-16, Session **Transport Phenomena in Solids: Point Defects and Reactivity of Solids** (Minneapolis 2007), gemeinsam mit der University of California at Davis
- **Aachen International Conference on Magnetic Resonance Microscopy**, zusammen mit dem Colloquium on Mobile NMR (Aachen 2007)
- 99. Bunsenkolloquium **From Macro to Nano** (Kloster Eberbach 2007), gemeinsam mit der TU Braunschweig und der Universität Gießen
- **International Symposium on Defects, Transport and Related Phenomena** during MS&T'07 (Detroit 2006), gemeinsam mit der Cornell University und der Northwestern University

## Ergebnisse der bisherigen Aktivitäten

Als forschungsorientiertes Kompetenzzentrum betrachtet die **CCC** in erster Linie die Qualität und Anzahl der von ihr publizierten Forschungsergebnisse als Indikatoren ihres Erfolgs. Schon in den ersten vier Jahren ihres aktiven Bestehens produzierte die **CCC** rund 30 Originalpublikationen pro Jahr, und zwar in durchgängig referierten Journalen von internationalem Zuschnitt. In den vergangenen beiden Jahren ist die Produktivität

erneut weiter angestiegen, und sie liegt mittlerweile bei jährlich um die **50 Originalpublikationen**, ein sehr erfreuliches Ergebnis. Bei Interesse sind sämtliche Publikationen direkt von den Korrespondenzautoren als Sonderdrucke erhältlich.

### *Publikationen im Jahre 2005*

- *Multispin moments edited by multiple-quantum NMR: application to elastomers*, M. A. Voda, D. E. Demco, J. Perlo, E. A. Orza, B. Blümich, *J. Magn. Reson.* **2005**, 172, 98.
- *NMR Velocimetry of Flow in Model Fixed-Bed Reactors of Low Aspect Ratio*, X. Ren, S. Stapf, B. Blümich, *AIChE J.* **2005**, 51, 392.
- *High-resolution NMR spectroscopy with a portable single-sided sensor*, J. Perlo, V. Demas, F. Casanova, C.A. Meriles, J. Reimer, A. Pines, B. Blümich, *Science* **2005**, 308, 1278.
- *Two-dimensional exchange  $^{35}\text{Cl}$  NQR spectroscopy of hexachloroethane*, M. Mackowiak, N. Sinyavsky, B. Blümich, *J. Mol. Struct.* **2005**, 743, 53.
- *Mobile high resolution Xenon NMR*, S. Appelt, F. W. Häsing, H. Kühn, J. Perlo, B. Blümich, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, 94, 197602.
- *Kernspintomographie für Medizin und Materialforschung: Ein mobiler und offener Kernspintomograph*, B. Blümich, C. Kölker, F. Casanova, J. Perlo, J. Felder, *Phys. Unserer Zeit* **2005**, 36, 236.
- *Visualizing flow vortices inside a single levitated drop*, A. Amar, E. Groß-Hardt, A. A. Khrapitchev, S. Stapf, A. Pfennig, B. Blümich, *J. Magn. Reson.* **2005**, 177, 74.
- *Surface induced molecular dynamics of thin liquid films confined to submicron cavities: A  $^1\text{H}$  multiple-quantum NMR study*, B. Jagadeesh, A. Prabhakar, D. E. Demco, A. Buda, B. Blümich, *Chem. Phys. Lett.* **2005**, 404, 177.
- *Molecular dynamics heterogeneities of confined lipid films by  $^1\text{H}$  magnetization - exchange NMR*, A. Buda, B. Jagadeesh, D. E. Demco, B. Blümich, *J. Chem. Phys.* **2005**, 122, 034701.
- *Electronic Structure and Magnetic Exchange Coupling in Ferromagnetic Full Heusler Alloys*, Y. Kurtulus, R. Dronskowski, G. Samolyuk, V. P. Antropov, *Phys. Rev. B* **2005**, 71, 14425-1.
- *Internal fluid dynamics in levitated drops by fast magnetic resonance velocimetry*, A. Amar, S. Stapf, B. Blümich, *Phys. Rev. E* **2005**, 72, 030201.

- *Vorhersage neuer ferromagnetischer Nitride auf der Basis von Elektronenstrukturrechnungen: IrFe<sub>3</sub>N und RhFe<sub>3</sub>N*, J. von Appen, R. Dronskowski, *Angew. Chem.* **2005**, 116, 1230; *Predicting new ferromagnetic nitrides from electronic structure theory: IrFe<sub>3</sub>N and RhFe<sub>3</sub>N*, J. von Appen, R. Dronskowski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, 43, 1205.
- *Synthesis, structure and properties of the new rare-earth Zintl phase Yb<sub>11</sub>GaSb<sub>9</sub>*, S. Bobev, V. Fritsch, J. D. Thompson, J. L. Sarrao, B. Eck, R. Dronskowski, S. M. Kauzlarich, *J. Solid State Chem.* **2005**, 178, 1071.
- *A Theoretical Study on the Existence and Structures of Some Hypothetical First-Row Transition-Metal M(NCN) Compounds*, M. Launay, R. Dronskowski, *Z. Naturforsch. B* **2005**, 60, 437.
- *First-Principles Electronic Structure, Chemical Bonding and High-Pressure Phase Prediction of the Oxynitrides of Vanadium, Niobium and Tantalum*, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 887.
- *LiM<sub>2</sub>(NCN)X<sub>3</sub> (M = Eu, Sr; X = Br, I): Synthesis and crystal structures of extended carbodiimides with empty tetrahedral metal entities*, W. Liao, J. von Appen, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 1953.
- *A theoretical study on the structures and energetics of hypothetical TiM(NCN)<sub>3</sub> compounds of the 3d transition metals*, M. Launay, R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.* **2005**, 26, 1180.
- *Group functions for the analysis of the electronic structures of polymers*, A. Tokmachev, R. Dronskowski, *Phys. Rev. B* **2005**, 71, 195202-1.
- *A Novel Method for Synthesizing Crystalline Copper Carbodiimide, CuNCN. Structure Determination by X-ray Rietveld Refinement*, X. Liu, M. A. Wankeu, H. Lueken, R. Dronskowski, *Z. Naturforsch. B* **2005**, 60, 593.
- *Synthese, Kristallstruktur und magnetische Eigenschaften des halbhartem itineranten Ferromagneten RhFe<sub>3</sub>N*, A. Houben, P. Müller, J. von Appen, H. Lueken, R. Niewa, R. Dronskowski, *Angew. Chem.* **2005**, 117, 7379; *Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of the Semihard Itinerant Ferromagnet RhFe<sub>3</sub>N*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, 44, 7212.
- *Synthesis, crystal structure determination and Fe/Rh site preference in the new ternary boride FeRh<sub>6</sub>B<sub>3</sub>*, B. P. T. Fokwa, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 2478.
- *The magnetic structure of TlCrTe<sub>2</sub>*, S. Ronneteg, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, R. Berger, *J. Alloys Compd.* **2005**, 403, 71.
- *Conformational Dimorphism of 1,1,3,3,5,5-hexachloro-1,3,5-trigermacyclohexane: Solvent-Induced Crystallization of a Metastable Polymorph Containing Boat-Shaped Molecules*, V. Ischenko, U. Englert, M. Jansen, *Chem. Eur. J.* **2005**, 11, 1375.

- *The First trans-Configured Cyclopalladated Amine*, B. Calmuschi-Cula, I. Kalf, R. Wang, U. Englert, *Organometallics* **2005**, 24, 5491.
- *Crystal engineering based on preferred mirror image recognition in square planar Pd(II) complexes*, B. Calmuschi, U. Englert, *CrystEngComm* **2005**, 7, 171.
- *Kristall-zu-Kristall-Umwandlung von einem Kettenpolymer zu einem zweidimensionalen Netz bei sehr tiefen Temperaturen*, C. Hu, U. Englert, *Angew. Chem.* **2005**, 117, 2321.
- *Multinuclear and Dynamic NMR analyses of trans-{Pt(Cl)(PHCy<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(PCy<sub>2</sub>)}, [Pt(PHCy<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Cl][BF<sub>4</sub>], [Pt(PHCy<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Cl][Cl], trans-{Pt(Cl)(PHCy<sub>2</sub>)<sub>2</sub>[P(S)Cy<sub>2</sub>]} and trans-{Pt(Cl)(PHCy<sub>2</sub>)<sub>2</sub>[P(O)Cy<sub>2</sub>]}. Influence of intramolecular P=O...H and Cl...H interactions on restricted rotation about Pt-P bond. X-Ray structure of trans-{Pt(Cl)(PHCy<sub>2</sub>)<sub>2</sub>[P(O)Cy<sub>2</sub>]}*, P. Mastrorilli, C. F. Nobile, M. Latronico, V. Gallo, U. Englert, F. P. Fanizzi, O. Sciacovelli, *Inorg. Chem.* **2005**, 44, 9097.
- *Spinel-type gallium oxynitrides attainable at high pressure and high temperature*, Peter Kroll, *Phys. Rev. B.* **2005**, 72, 144407.
- *Formation of spinel-type gallium oxynitrides: a density functional study of binary and ternary phases in the system Ga-N-O*, P. Kroll, R. Dronskowski, M. Martin, *J. Mater. Chem.* **2005**, 15, 3296.
- *Prediction of novel phases of tantalum(V) nitride (Ta<sub>3</sub>N<sub>5</sub>) and tungsten(VI) nitride (WN<sub>2</sub>) attainable through high pressure/high temperature chemical synthesis*, P. Kroll, T. Schroeter, M. Peters, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, 44, 4249.
- *SrSi<sub>6</sub>N<sub>8</sub> - A Reduced Nitridosilicate with a Si-Si Bond*, F. Stadler, O. Oeckler, J. Senker, H. A. Höpfe, P. Kroll, W. Schnick, *Angew. Chem.* **2005**, 117, 573.
- *Modelling Polymer Derived Ceramics*, P. Kroll, *J. Eur. Ceram. Soc.* **2005**, 25, 163.
- *Chemo- and periselectivity in the addition of [OsO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] to ethylene: a theoretical study*, M. Hölscher, W. Leitner, M. C. Holthausen, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* **2005**, 11, 4700.
- *Practical Guide to Measurement and Interpretation of Magnetic Properties (IUPAC Technical Report)*, S. Hatscher, H. Schilder, H. Lueken, W. Urland, *Pure Appl. Chem.* **2005**, 77, 497.
- *Weak intermolecular interactions calculated with diffusion Monte Carlo*, C. Diedrich, A. Lüchow, S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2005**, 123, 184106.
- *Performance of diffusion Monte Carlo for the first dissociation energies of transition metal carbonyls*, C. Diedrich, A. Lüchow, S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2005**, 122, 21101.



- *The Influence of Cation and Vacancy Distributions on the Ionic Conductivity of Acceptor Doped Oxygen Ion Conductors*, M. Martin, *Z. Phys. Chem.* **2005**, 219, 105.
- *Ionic conductivity of undoped BaTiO<sub>3-δ</sub> with electron transfer suppressed*, L.-X. He, D.-K. Lee, H.-I. Yoo, M. Martin, *Solid State Ionics* **2005**, 176, 929.
- *Characterization of Mo-V-W Mixed Oxide Catalysts by ex situ and in situ X-Ray Absorption Spectroscopy*, G. Schimanke, M. Martin, J. Kunert, H. Vogel, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 1289.
- *Determining oxygen isotope profiles in oxides with Time-of-Flight SIMS*, R. A. De Souza, J. Zehnpfenning, M. Martin, J. Maier, *Solid State Ionics* **2005**, 176, 1465.
- *Diffusion in oxides*, M. Martin, in *Diffusion in Condensed Matter, Methods, Materials, Models*, P. Heitjans, J. Kärger (Eds.) Springer (2005), pp 209-248.
- *MCD of Nonaromatic Cyclic π-Electron Systems. Part 6: Pentalenes and Heptalenes*, J. Fleischhauer, G. Raabe, K. A. Klingensmith, U. Höweler, P. K. Chatterjee, K. Hafner, E. Vogel, J. Michl, *Int. J. Quantum Chem.* **2005**, 102, 925.
- *Dynamic Behavior of Chiral Sulfonimodol-Substituted Allyl and Alkyl (Dimethylamino)titanium(IV) Complexes: Metallotropic Shift, Reversible β-Hydride Elimination/Reinsertion, and ab Initio Calculations of Allyl and Alkyl Aminosulfoxonium Ylides*, H.-J. Gais, P. R. Bruns, G. Raabe, R. Hainz, M. Schleusner, J. Runsink, G. S. Babu, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, 127, 6617.
- *First Asymmetric Synthesis and Determination of the Absolute Configuration of a Lignan Isolated from *Virola sebifera**, D. Enders, M. Milovanovic, E. Voloshina, G. Raabe, J. Fleischhauer, *Eur. J. Org. Chem.* **2005**, 1984.
- *Proton affinities and relative basicities of two 1,4,7-triazacyclononanes, Me<sub>3</sub>TACN and TP-TACN. Quantum-chemical ab initio calculations, solution measurements, and the structure of [TP-TACN·2H]<sup>2+</sup> in the solid state*, N. C. Meyer, C. Bolm, G. Raabe, U. Kölle, *Tetrahedron* **2005**, 61, 12371.
- *Semiempirical Calculations on the Dipole Moment Enhancement in the Solid State*, G. Raabe, *Z. Kristallographie, Suppl.* **2005**, 22,131.
- *Gas Phase Structure of Ruppert's Reagenz, CH<sub>3</sub>SiMe<sub>3</sub>*, K. Klätte, D. Christen, I. Merke, W. Stahl, H. Oberhammer, *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109, 8438.

## Publikationen im Jahre 2006

- *Flow dynamics measured and simulated inside a single levitated droplet*, E. Groß-Hardt, A. Amar, S. Stapf, B. Blümich, A. Pfennig, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2006**, 45, 460.
- *Electron Group Functions for the Analysis of the Electronic Structures of Molecules*, A. Tokmachev, R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.* **2006**, 27, 296.
- *Chemical Analysis by Ultrahigh Resolution Nuclear Magnetic Resonance in the Earth's Magnetic Field*, S. Appelt, H. Kühn, F. W. Häsing, B. Blümich, *Nature Physics* **2006**, 2, 105.
- *Segmental mobility in short-chain grafted-PDMS by homo- and heteronuclear residual dipolar couplings*, M. Bertmer, M. Wang, D. E. Demco, B. Blümich, *Solid State NMR* **2006**, 30, 45.
- *Ti<sub>2</sub>Rh<sub>6</sub>B — Synthesis and Characterization of a new Boride with a Double Perovskite-Like Structure containing Octahedral Rhodium Clusters*, B. P. T. Fokwa, B. Eck, R. Dronskowski, *Z. Kristallogr.* **2006**, 221, 445.
- *A Geminal Model for the Electronic Structures of Extended Systems*, A. Tokmachev, R. Dronskowski, *Chem. Phys.* **2006**, 322, 423.
- *Electronic Structure, Chemical Bonding and Finite-Temperature Magnetic Properties of full Heusler Alloys*, Y. Kurtulus, M. Gilleßen, R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.* **2006**, 27, 90.
- *Changes of the magnetic interactions in TiCo<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> upon metal substitution*, S. Ronneteg, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, R. Berger, *J. Magn. Magn. Mater.* **2006**, 303, 204.
- *Structure and Stability of TaON polymorphs*, T. Bredow, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, H. Schilling, J. Pickardt, M. Lerch, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 1157.
- *Fluorite-type Solid Solutions in the System Y-Ta-O-N: A Nitrogen-Rich Analogue to Ytria-Stabilized Zirconia (YSZ)*, H. Schilling, H. Wolff, R. Dronskowski, M. Lerch, *Z. Naturforsch. B* **2006**, 61, 660.
- *A density-functional and molecular-dynamics study on the physical properties of yttrium-doped tantalum oxynitride*, H. Wolff, H. Schilling, M. Lerch, R. Dronskowski, *J. Solid State Chem.* **2006**, 179, 2265.
- *Unusual Mn–Mn Spin Coupling in the Polar Intermetallic Compounds CaMn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> and SrMn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>*, S. Bobev, J. Merz, A. Lima, V. Fritsch, J. D. Thompson, J. L. Sarrao, M. Gillessen, R. Dronskowski, *Inorg. Chem.* **2006**, 45, 4047.

- *A new anatase-type phase in the system Mg-Ta-O-N*, H. Schilling, M. Lerch, A. Börger, K.-D. Becker, H. Wolff, R. Dronskowski, T. Bredow, M. Tovar, C. Baehtz, *J. Solid State Chem.* **2006**, 179, 2383.
- *Geheimnisvolles Platinnitrid*, J. von Appen, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, *Angew. Chem.* **2006**, 118, 4472; *Mysterious Platinum Nitride*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, 45, 4365.
- *Prediction and synthesis of the new quaternary nitride Ni<sub>0.5</sub>Rh<sub>0.5</sub>Fe<sub>3</sub>N*, A. Houben, J. Sielk, J. von Appen, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2097.
- *A first-principles study of defect migration in fluorite-type tantalum oxynitrides*, H. Wolff, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2101.
- *Falsification of Pd<sub>2</sub>N from electronic structure theory*, J. von Appen, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2105.
- *A density-functional study of the balance of magnetic exchange interactions in CaMn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> and SrMn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>*, M. Gilleßen, S. Bobev, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2108.
- *Chemical Bonding, Magnetic and Spectroscopic Properties of GdRu<sub>2</sub>SiC*, Th. Fickenscher, S. Rayaprol, R. Pöttgen, J. von Appen, R. Dronskowski, K. Łatka, J. Gurgul, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2114.
- *Ti<sub>8</sub>Fe<sub>3</sub>Ru<sub>18</sub>B<sub>8</sub>, a novel complex boride containing chains of Fe<sub>2</sub> dumbbells: crystal structure and magnetism*, B. P. T. Fokwa, H. Lueken, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2125.
- *γ-TaON: A New Metastable Polymorph of Tantalum Oxynitride*, H. Schilling, E. Irran, H. Wolff, T. Bredow, R. Dronskowski, M. Lerch, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2136.
- *Synthesis, Crystal Structure and High Temperature Behavior of an Anatase-Type Phase in the System Mg-Ta-O-N*, H. Schilling, M. Lerch, A. Börger, K.-D. Becker, H. Wolff, R. Dronskowski, T. Bredow, M. Tovar, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2138.
- *Synthesis of a missing structural link: The first trigonal planar B<sub>4</sub> units in the novel complex boride Ti<sub>1+x</sub>Os<sub>2-x</sub>RuB<sub>2</sub> (x = 0.6)*, B. P. T. Fokwa, J. von Appen, R. Dronskowski, *Chem. Commun.* **2006**, 4419.
- *Unexpected solids from enantiopure cationic palladium complexes and racemic anions: A structural study of chiral non-discrimination*, I. Kalf, R. Wang, U. Englert, *J. Organomet. Chem.* **2006**, 691, 2277.
- *Raumerfüllung gegen Symmetrie: zwei aufeinanderfolgende Kristall-zu-Kristall-Umwandlungen in einem zweidimensionalen Netz*, C. Hu, U. Englert, *Angew. Chem.* **2006**, 118, 3535.

- *Homo- and heterochiral coordination polymers of silver with diaminocyclohexane as bridging ligand: The effect of chirality on argentophilic interactions*, I. Kalf, M. Braun, Y. Wang, U. Englert, *CrystEngComm* **2006**, 8, 916.
- *High-pressure chemistry of nitride-based materials*, E. Horvath-Bordon, R. Riedel, A. Zerr, P. F. McMillan, G. Auffermann, Y. Prots, W. Bronger, R. Kniep, P. Kroll, *Chemical Society Reviews* **2006**, 35, 987.
- *Shell-like structure of valence band orbitals of silicon nanocrystals in silica glass*, P. Kroll, H. J. Schulte, *Phys. Stat. Sol. (b)* **2006**, 243, R47.
- *Poly(ethylene oxide-CO-tetrahydrofuran) and Poly(propylene oxide-CO-tetrahydrofuran): synthesis and thermal degradation*, Th. Hövetborn, M. Hölscher, H. Keul, H. Höcker, *Rev. Roumaine Chim.* **2006**, 51, 781.
- *DFT investigation of the potential of [H-M{(NHCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>X}] catalysts (M=Mo, Ru, Os; X = N,P) for the reduction of N<sub>2</sub> to NH<sub>3</sub> by H<sub>2</sub>*, M. Hölscher, W. Leitner, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006**, 4407.
- *Computational Magnetochemistry: Complementary Quantum Mechanical Tools (Research Report)*, Th. Eifert, K. Handrick, F. Hüning, U. Neuhausen, H. Schilder, H. Lueken, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 521.
- *Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of Na<sub>3</sub>OsO<sub>7</sub>*, K. M. Mogare, W. Klein, H. Schilder, H. Lueken, M. Jansen, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2006**, 632, 2389.
- *IUPAC-Empfehlungen: Praktische Anleitung zur Messung und Interpretation magnetischer Eigenschaften*, H. Lueken, *Angew. Chem.* **2006**, 118, 8233.
- *Internal rotation, quadrupole coupling and structure of (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Sil studied by microwave spectroscopy and ab-initio calculations*, I. Merke, A. Lüchow, W. Stahl, *J. Mol. Struct.* **2006**, 780-781, 295.
- *Rydberg states with quantum Monte Carlo*, A. Bande, A. Lüchow, F. Della Sala, A. Görling, *J. Chem. Phys.* **2006**, 124, 114114.
- *Electrochemical incorporation of nitrogen into zirconia solid electrolyte*, I. Valov, C. Korte, R. A. De Souza, M. Martin, J. Janek, *Electrochemical and Solid State Letters* **2006**, 9, F23.
- *Correlation Effects for Cation Diffusion via Vacancy-Pairs in Fluorite-Related Oxides*, I. V. Belova, D. Samuelis, M. Martin, G. E. Murch, *Phil. Mag.* **2006**, 86, 3559.
- *Vaporization and Diffusion Studies on the stability of Doped Lanthanum Gallates*, M. Stanislawski, D.-H. Peck, S.-K. Woo, L. Singheiser, K. Hilpert, O. Schulz, M. Martin, *Fuel Cells* **2006**, 6, 270.

- *Secondary Ion Mass Spectroscopy – SIMS*, R. De Souza, M. Martin, *Bunsen-Magazin* **2006**, 8, 109.
- *Contribution to the Theory of Demixing of Yttrium in Yttria-Stabilized-Zirconia in an Electric Field*, I. V. Belova, G. E. Murch, D. Samuelis, M. Martin, *Advances in Science and Technology* **2006**, 46, 42.
- *Cation Diffusion and Demixing in Yttria Stabilized Zirconia: Comparison of Assumptions of Constant Electric Field and Constant Current*, I. V. Belova, D. Samuelis, M. Martin, G. E. Murch, *Defect and Diffusion Forum* **2006**, 258-260, 247.
- *On the ionic conductivity of strongly acceptor doped, fluorite-type oxygen ion conductors*, M. Martin, *J. Electroceram.* **2006**, 17, 765.
- *An Attempt to Determine the Absolute Configuration of Two Ascolactone Stereoisomers with Time-Dependent Density Functional Theory*, S. F. Seibert, G. M. König, E. Voloshina, G. Raabe, J. Fleischhauer, *Chirality* **2006**, 18, 413.
- *Polyketides from the Marine-Derived Fungus *Ascochyta salicorniae* and their Potential to Inhibit Protein Phosphatases*, S. F. Seibert, E. Eguereva, A. Krick, S. Kehraus, G. Raabe, J. Fleischhauer, E. Leistner, M. Wiese, H. Prinz, K. Alexandrov, P. Janning, H. Waldmann, G. M. König, *Organic & Biomolecular Chemistry* **2006**, 4, 2233.
- *Functionalized Chiral Vinyl Aminosulfoxonium Salts: Asymmetric Synthesis and Application to the Synthesis of Enantiopure Unsaturated Prolines,  $\beta,\gamma$ -Dehydro Amino Acids, and Cyclopentanoid Keto Aminosulfoxonium Ylides*, S. K. Tiwari, H.-J. Gais, A. Lindenmeier, G. S. Babu, G. Raabe, L. Rajender Reddy, F. Köhler, M. Günter, S. Koep, V. B. Reddy Iska, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 7360.
- *The Rotational Spectrum of Bromoacetyl Chloride*, I. Merke, N. Vaeck, D. Petitprez, G. Wlodarczak, *J. Mol. Struct.* **2006**, 780 - 781, 306.
- *Millimeterwave rotational spectrum and internal rotation in o-chlorotoluene*, K. P. R. Nair, J. Demaison, G. Wlodarczak, I. Merke, *J. Mol. Spectrosc.* **2006**, 237, 137.
- *Microwave Spectrum, Tunneling Motions, and Quadrupole Coupling, Hyperfine Structure of Ethylene Diamine*, I. Merke, L.H. Coudert, *J. Mol. Spectrosc.* **2006**, 237, 174.
- *Microwave and Theoretical Investigation of the Internal Rotation in m-Cresol*, A. Hellweg, C. Hättig, I. Merke, W. Stahl, *J. Chem. Phys.* **2006** 124, 204305.
- *The Bending Triad of the Quasi-Spherical Top Molecule  $SO_2F_2$  in the  $550\text{ cm}^{-1}$  Region*, M. Rotger, V. Boudon, M. Loëte, N. Zvereva-Loëte, L. Margulès, J. Demaison, I. Merke, F. Hegelund, H. Bürger, *J. Mol. Spectrosc.* **2006**, 238, 145.

- *Microwave, Millimeterwave, and High-Resolution FTIR Study of the  $\nu_2=1$  State of  $SO_2F_2$* , I. Merke, N. Heineking, F. Hegelund, J. Demaison, L. Margulès, H. Bürger, *J. Mol. Struct.* **2006**, 795, 185.

Ungeachtet des sehr ergiebigen Publikationswesens machen (eingeladene) auswärtige Vorträge seit jeher einen wichtigen Bestandteil der wissenschaftlichen Praxis aus, insbesondere wenn sie aus dem Ausland angefragt werden. Die nachfolgende **Auswahl** von Vorträgen Aachener **CCC**-Mitglieder und ihrer Mitarbeiter belegt die hohe Forschungsqualität anhand der externen Wahrnehmung und Wertschätzung:

- **Structures, Transformations, and Some New Developments in Nitrides from Computations** – P. Kroll; CECAM-Workshop on Mineral Physics with Computation and Experiment (Lyon 2006)
- **Single Crystals of a new Carbon Nitride Phase with all- $sp^3$  Carbon** – P. Kroll; MRS Fall Meeting (Boston 2006)
- **Morphological instabilities during solid state reactions: Microstructured interfaces** – M. Martin; Workshop on New Frontier of Hetero-Interface Modification for High Temperature Applications Based on Nanoionics Principle (Sendai 2005)
- **Vacancy Distribution and Diffusion in Doped Zirconia (YSZ) and Doped Lanthanum Gallate (LSGM)** – M. Martin; International Conference on Electroceramics (Seoul 2005)
- **Vom Festkörper zum Funktionsmaterial: Physikalische Festkörperchemie** – M. Martin; GDCh-Jahresversammlung (Düsseldorf 2005)
- **Vacancy Distribution and Oxygen Diffusion in Doped Lanthanum Gallate (LSGM)** – M. Martin; E-MRS Annual Meeting (Nice 2006)
- **Metal oxidation kinetics and oxide texture evolution studied by in situ X-ray diffraction** – M. Martin; MS&T'06 (Minneapolis 2006)
- **In situ Investigations on the High Temperature Oxidation of Metals** – M. Martin; 16th Iketani Conference: Electrochemistry and Thermodynamics on Materials Processing for Sustainable Production (Tokyo 2006)
- **Organische Verbindungen im festen Zustand – Berechnungen der intermolekularen Wechselwirkungen in Molekülkristallen** – G. Raabe; Wilhelm-Ostwald-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie (Leipzig 2005)
- **Electronic Structure, Phase Stability and Chemical Bonding of Transition-Metal Oxynitrides from First Principles** – R. Dronskowski; International Conference on Nonstoichiometric Compounds (Kauai 2005)
- **Novel Solid-State Materials by Quantum-Chemical and Synthetic Approaches** – R. Dronskowski; Chinese Academy of Science (Changchun 2006)

- **Techniques et applications de la spectroscopie micro-onde en jet supersonique** – I. Merke; Réunion de la Groupe de Contacte F.N.R.S Spectroscopie moléculaire à haute résolution, Facultés Universitaires Notre Dame de la Paix (Namur 2005)
- **Modern Techniques in Microwave Spectroscopy** – I. Merke; Institute of Chemical Technology, Charles University (Prag 2006)
- **Nodal hypersurfaces of Atomic and Molecular wave functions** – A. Lüchow; Pacifichem 2005 (Honolulu 2005)
- **Rydberg-Zustände mit der Quanten-Monte-Carlo-Methode** – A. Bande; AMOP-Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (Frankfurt 2006)
- **Rydberg States With Quantum Monte Carlo** – A. Bande; 1st European Chemistry Congress (Budapest 2006)

Bereits seit dem Jahre 2003 werden die Aktivitäten der **CCC** von verschiedenen **Drittmittelgebern** gefördert. Im betrachteten Zeitraum (2005 und 2006) wurden folgende Projekte von **CCC-Mitgliedern** gewonnen bzw. bearbeitet:

- **Cokristallisation – molekulare Verbindungen und Legierungen**, DFG-Normalverfahren
- **Grundlagenuntersuchung zur kombinatorischen Kernspintomographie mit planaren Mikropulsen im Niederfeld**, DFG-Normalverfahren
- **Understanding the deformation mechanism of PE and PP incorporating the latest developments**, Forschungs- und Entwicklungsvertrag DSM Niederlande
- **Surface and confirmant effect on lipid films by NMR**, DFG-Normalverfahren
- **Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in mehrphasigen fluiden Reaktionssystemen**, Sonderforschungsbereich 540
- **Zustandsbewertung von Betriebsmitteln und Anlagen der elektrischen Energieversorgung**, DFG-Normalverfahren
- **Charakterisierung der 2-2-Photodimerisierung von Zimtsäure und deren Derivaten mit Festkörper-NMR**, DFG-Normalverfahren
- **Access, Research and Technology for the conservation of the European Cultural Heritage**, EU-Projekt
- **Application of ultrafast multidimensional NMR methods to material science**, GIF-Projekt
- **Moleküldynamik und Ordnungsprozesse in Nanoschichten oberflächenadsorbierender Polymere mit NMR-Relaxometrie**, DFG-Normalverfahren
- **Development of methodologies and portable sensors for high-resolution NMR spectroscopy in inhomogeneous fields**, DFG-Normalverfahren

- **Einfluß der Gas- und Dampfblasenbildung in porösen Katalysatoren auf die effektive Reaktionsrate: Untersuchungen mit NMR-Methoden und Methoden der chemischen Reaktionstechnik, DFG-Normalverfahren**
- **Quantifizierte Bildgebung von Wasserverteilung und -fluß in Böden mit mobilen NMR Sonden, DFG-Normalverfahren**
- **Ermittlung des Alterungszustandes von Kunststoffbeschichtungen auf Beton mit NMR-Verfahren, AIF-Projekt**
- **Quantenchemische und bindungstheoretische Untersuchungen an binären und ternären ferromagnetischen Legierungen der Übergangsmetalle, DFG-Normalverfahren**
- **Quantum-chemical and bond theoretical investigations of complex (ternary and higher) itinerant transition-metal alloys and borides, DFG-Normalverfahren**
- **Quantenchemische Untersuchungen zur Existenz, Struktur und Bindung einfacher Oxidnitride der Übergangsmetalle (V. und VIII. Nebengruppe) sowie von Oxidnitriden des Galliums, DFG-Schwerpunktprogramm 1136**
- **Quantenchemische Untersuchungen zur Existenz, Struktur und Bindung quaternärer Oxidnitride der Übergangsmetalle sowie zur Ionenleitung in Oxidnitriden und verwandten Systemen, DFG-Schwerpunktprogramm 1136**
- **Rational design and quantum chemistry of complex itinerant intermetallic magnets: syntheses, crystal structures, magnetic properties and quantum-chemical calculations of new complex borides of the transition metals, DFG-NSF-Initiative zur europäisch-amerikanischen Zusammenarbeit in der Materialforschung**
- **Quantum-chemical prediction and computational characterization of high-pressure transition-metal nitrides and oxynitrides, DFG-Schwerpunktprogramm 1236**
- **Kristallisationsprozesse, Forschungs- und Entwicklungsvertrag Grünenthal GmbH**
- **Modellierung und Simulation nanoskaliger Präzipitate in amorphen Matrices, DFG-Schwerpunktprogramm *Nanoskalige anorganische Materialien durch molekulares Design: Neue Werkstoffe für zukunftsweisende Technologien***
- **Unusual Stability of Polymer Derived Ceramics at High Temperatures, DFG-NSF Initiative zur europäisch-amerikanischen Zusammenarbeit in der Materialforschung**
- **High-Pressure Phases of Nitridosilicates and Oxonitridosilicates, DFG-Schwerpunktprogramm 1236**
- **High-Pressure Synthesis of Silicon Carbon Nitrides, DFG-Schwerpunktprogramm 1236**
- **CVD-Synthese und Charakterisierung von Si/(B)/(C)/N-Hartstoffschichten für tribologische Anwendungen, DFG-Schwerpunktprogramm *Anorganische Materialien durch Gasphasensynthese: Interdisziplinäre Ansätze zur Entwicklung, Verständnis und Kontrolle von CVD-Verfahren***
- **Electron structure quantum Monte Carlo, DFG-Schwerpunktprogramm 1145 *First-principles methods for many-electron systems in chemistry and physics***



- **Developments in Electron structure quantum Monte Carlo methods**, DFG-Schwerpunktprogramm 1145
- **Structural and Magnetochemical Investigations into Spin-Spin Exchange Couplings in Heterodinuclear d-f Complexes**, DFG-Schwerpunktprogramm *Molecular Magnetism*
- **Untersuchungen zur Stabilität von nanokristallinem Maghemit ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ )**, DFG-Normalverfahren
- **Untersuchungen zur Defektchemie und Diffusion in Bariumtitanat  $\text{BaTiO}_3$** , DFG-Normalverfahren
- **Aufklärung der Funktion und der Dynamik von Sauerstoff-Spezies in Mo/V-Mischoxid-Katalysatoren bei der Partialoxidation von einfachen Aldehyden**, DFG-Schwerpunktprogramm 1091 *Brückenschläge zwischen idealen und realen Systemen in der Heterogenen Katalyse*
- **Oxidnitride des Galliums – Bildungskinetik, Defektchemie und Transportvorgänge**, DFG-Schwerpunktprogramm 1136
- **Transportprozesse in stickstoffdotierten Oxiden**, DFG-Schwerpunktprogramm 1136

Zusätzlich wurden erhebliche personengebundene Förderungen eingeworben:

- ein dreijähriges **DAAD-Stipendium** zur Promotion (O. Succre)
- ein zweijähriges **Minerva-Stipendium** für eine Postdoktorandin (Dr. Rubin-Preminger)
- ein zweimonatiger **DAAD-Gastaufenthalt** (Dr. Turgunov)
- ein **Heisenberg-Stipendium** der DFG (Priv.-Doz. Dr. Kroll)
- eine zweijährige Förderung durch den Deutschen Akademischen Austauschdienst im Rahmen des **Projektbezogenen Personenaustauschprogramms** mit der **Volksrepublik China**
- ein dreijähriges Doktorandenstipendium der **Friedrich-Ebert-Stiftung**
- ein einjähriges Postdoc-Stipendium der **Canon Foundation**
- ein dreimonatiges Postdoc-Stipendium des **Tokyo Institute of Technology**
- eine **Mercator-Professur** (Prof. Jeff Reimer)

## Lehre

Die hohe Wertschätzung, die die Mitglieder der **CCC** der universitären Lehre entgegenbringen, insbesondere für den Bereich der **Computational Chemistry**, wurde bereits explizit erwähnt. Diesbezügliche Techniken finden sich mittlerweile in nahezu allen Fortgeschrittenenpraktika der Aachener Chemie. Als nur zwei Beispiele von vielen seien die Beschäftigung fortgeschrittener Studierenden mit **Kraftfeldrechnungen** zur Erkundung des Konformationsraums von Molekülen oder die selbständige Durchführung voraussetzungsfreier **Bandstrukturrechnungen** an einfachen kondensierten Phasen erwähnt.

Die Jahre 2005 und 2006 waren darüber hinaus durch die enorm kräftezehrende Konzeption und Akkreditierung der **Bachelor-** und **Masterstudiengänge** Chemie gekennzeichnet, deren Einführung von der Politik zuvor beschlossen worden war (Bologna-Protokoll); gleiches gilt für die rückstandsfreie Entsorgung des auch international hervorragend bewährten Diplomstudiengangs. Die Mitglieder der **CCC** haben mittels geduldiger Überzeugungsarbeit erfolgreich dazu beigetragen, Lehrinhalte der **Computational Chemistry** zu essentiellen Bestandteilen des **Bachelorstudiengangs** zu machen. Beispielsweise finden sich bereits zu Beginn des Studiums die einsemestrigen **Computeranwendungen in der Chemie**, in denen die Studierenden den kompetenten Umgang mit chemierelevanter Software erlernen und einen Einblick in die Erstellung von Computerprogrammen erhalten sollen. Basierend auf den gängigen Einführungsvorlesungen der klassisch-chemischen Disziplinen knüpft die einsemestrige Veranstaltung **Theorie der chemischen Bindung** im 4. Fachsemester als erste quantenchemische Einführung an. Schließlich werden die Studierenden im 5. Fachsemester mit der einsemestrigen Veranstaltung **Computational Chemistry** konfrontiert, gehalten von Mitgliedern der **CCC**. Die Studierenden erwerben hier die Grundlagen zur Modellierung molekularer und ausgedehnter Systeme.

Auch für den Bereich des **Masterstudiengangs** Chemie sind Fortschritte erkennbar. Die drei traditionellen Forschungsschwerpunkte der Aachener Chemie erfahren eine moderne Erweiterung, denn im Masterstudiengang werden nunmehr **vier Vertiefungsrichtungen** angeboten. Diese sind:

- Bioaktive Verbindungen und synthetische Methoden (SYN)
- Katalyse (CAT)
- Werkstoffe und mesoskopische Systeme: Festkörper, Polymere und Nanostrukturen (MES)
- **Computerchemie und Spektroskopie (COS)**

Es ist absehbar, daß Studierende der Chemie insbesondere den neuen Bereich der **Computational Chemistry** (nebst Spektroskopie) zur fachlichen Profilbildung nutzen werden.

Darüber hinaus ist die RWTH selbst gegenwärtig bestrebt, im Rahmen der **Exzellenzinitiative** ihr naturwissenschaftliches Profil zu schärfen. Aus diesem Grund wird zur Zeit ein nichtkonsekutiver Masterstudiengang **Computational Engineering and Science** intensiv diskutiert und in Bälde eingerichtet, der insofern die noch bestehenden (ingenieur)wissenschaftlichen und RWTH-typischen Einschränkungen (Computational **Engineering Science**) durch Integration einer naturwissenschaftlichen Komponente aufheben soll; diese Entscheidung der RWTH wird ausdrücklich begrüßt. Der neue Masterstudiengang soll unter dem Dach der **German Research School of Simulation Science** (RWTH

Aachen und FZ Jülich) stattfinden, und der **CCC-Sprecher** bemüht sich als Mitglied der Studienkommission um die inhaltlich-chemische Ausgestaltung.

## Höchstleistungsrechner

Der Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums der RWTH ist seit geraumer Zeit bemüht, eine neue **Höchstleistungsrechenanlage** (Stichwort: High-Performance-Computing, HPC, auf der Basis von Parallelarchitektur) zu beantragen und zu beschaffen. Die Erfahrungen der **CCC** sind in diesem Sinn von hervorragender Bedeutung, wird ein Großteil der Aachener Rechenleistung von Mitgliedern der **CCC** in Anspruch genommen. Der **CCC-Sprecher** hat den Leiter des Rechenzentrums im Jahre 2006 bei der Vorstellung des Rechnerantrags vor dem Wissenschaftsrat und einer DFG-Kommission unterstützt. Die Fachgutachter haben in ihrem am Ende der Sitzung mündlich vorgetragenen Votum die Expertise der RWTH im Bereich HPC hervorgehoben und den Bedarf, gerade vor dem Hintergrund der Aktivitäten der RWTH im Bereich des Scientific Computing, gut nachvollziehen können.

## Internetpräsenz

Die **CCC** ist seit dem Frühjahr 2003 im Internet – **www.ccc.rwth-aachen.de** – zu erreichen. Die Website ist als Portal der RWTH-spezifischen Kompetenz auf dem Gebiet der **Computational Chemistry** zu verstehen und erlaubt interessierten Besuchern einen Einblick in die vielfältigen Aktivitäten. Insbesondere werden die Forschungsschwerpunkte der beteiligten Mitglieder aufgezeigt, des weiteren die aktuellen Publikationen, Links zu weiteren Seiten der **Computational Chemistry** und vieles mehr. Im Jahre 2006 wurde die Seite vollständig überarbeitet und mit einem neuen Webdesign ausgestattet. Es wäre weiterhin wünschenswert, diese Seite verstärkt für die elektronische Lehre einzusetzen, eine entsprechende Unterstützung durch die RWTH vorausgesetzt.

